# Quantenmechanik Formelsammlung

Gössl, Sebastian

19WS-22SS

**Zusammenfassung**

Dies ist eine grobe Zusammenfassung der Formeln aus der Vorlesung und zugehörigen Übung Quantenmechanik, veranstaltet von Evertz, Hans & Gazzaneo, Paolo. Hauptliteratur ist das lehrreiche Vorlesungsskript [1], auf welches immer für tiefere Einblicke und Kontext als Quelle verwiesen wird.
Ziel dieses Dokumentes ist es ein Arbeitsmittel des Übungsalltages und kein Lernmittel zu sein. Die Formeln sind so abstrakt gehalten, dass sie für möglichst viele Fälle direkt anwendbar sind; unkonkrete Konzepte & irrelevante Spezialfälle werden nicht übernommen.
Bei Fragen, Anregungen oder Verbesserungsvorschlägen, egal wie insignifikant diese scheinen mögen, bitte melden.

Source: `github.com/goessl/quantenmechanik`
Weitere nützliche Unterlagen: `www.student.tugraz.at/goessl`
Kontakt: goessl@student.tugraz.at

# Inhaltsverzeichnis

# Literatur

[1] Hans Gerd Evertz und Wolfgang von der Linden. *Quantenmechanik. Sommersemester 2017*. mit zusätzlichem Anhang 2019.

## Weiterführend

[2] Wolfgang Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 5/1. Quantenmechanik - Grundlagen*. 8. Aufl. Springer Spektrum Berlin, Heidelberg, 2013. ISBN: 978-3-642-25403-1. DOI: 10.1007/978-3-642-25403-1.

[3] Wolfgang Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 5/2. Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen*. 8. Aufl. Springer Spektrum Berlin, Heidelberg, 2014. ISBN: 978-3-662-44230-2. DOI: 10.1007/978-3-662-44230-2.

# Kapitel 1

# Zustände

Wahrscheinlichkeit von Messergebnis [1, Glg. 2.12]

$$W(a_j \mid \psi) = |\langle a_j|\psi\rangle|^2 \qquad \text{wobei } A = \sum_j a_j |a_j\rangle\langle a_j|$$

Erwartungswert [1, Glg. 2.16, S. 33]

$$\langle \hat{A}\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_j |\langle a_j|\psi\rangle|^2 a_j$$

Gebundenheit [1, Kap. 4.1.1]

- Gebundene Zustände $\Leftrightarrow$ normierbare Eigenzustände von $\hat{H}$
  - Diskretes Energiespektrum
- Unebundene Zustände $\Leftrightarrow$ nicht normierbare Eigenzustände von $\hat{H}$
  - Kontinuierliches Energiespektrum

Untere Energieschranke [1, Glg. 4.31]

$$E > \min_{\vec{x}} V(\vec{x})$$

## 1.1 Teilchenströme

Wahrscheinlichkeitsstromdichte & Kontinuität [1, Glg. 4.38]

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\ \psi^*(\vec{x},t)\vec{\nabla}\psi(\vec{x},t)$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{x},t) = -\vec{\nabla}\vec{j}(\vec{x},t)$$

Transmissions- & Reflexionskoeffizient [1, S. 116]

$$T + R = 1$$

## 1.2 Dichteoperator

Statistischer Operator [1, Glg. 9.5, 9.9, 9.8]

$$\hat{\rho} = \sum_j \rho_j \left|\varphi_j\right\rangle \left\langle\varphi_j\right| \qquad \operatorname{tr}\hat{\rho} = 1 \qquad \langle\hat{A}\rangle_{\hat{\rho}} = \operatorname{tr}\hat{\rho}\hat{A}$$

Hinreichende Charakterisierung eines reinen Zustandes [1, Glg. 9.10, 9.12, 9.13]

$$\hat{\rho} = \left|\psi\right\rangle \left\langle\psi\right| \qquad \hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \text{ (Idempotenz)} \qquad \operatorname{tr}\hat{\rho} = 1$$

Schrödingergleichung [1, Glg. 9.17]

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = \left[\hat{H}, \hat{\rho}(t)\right]$$

Reduzierte Dichtematrix [1, Glg. 9.23]

$$\tilde{\rho}_{ij} = \sum_k \rho_{kkij}$$

# Kapitel 2

# Operatoren

Korrespondenzprinzip [1, Glg. 2.13]

- Observablen sind hermitsche Operatoren

Dualraum [1, Glg. A.32]

$$\hat{A}\,|v\rangle = |w\rangle \qquad \Leftrightarrow \qquad \langle v|\,\hat{A}^\dagger = \langle w|$$

Matrixdarstellung [1, S. A.16]

$$\hat{O} = \sum_{ij} O_{ij}^{(e)}\,|e_i\rangle\,\langle e_j| \qquad \Leftrightarrow \qquad O_{ij}^{(e)} = \langle e_i|\hat{O}|e_j\rangle$$

Spur [1, Def. A.19, Thm. A.4]

$$\operatorname{tr}\hat{O} = \sum_i \langle e_i|\hat{O}|e_i\rangle \qquad \text{(basisunabhängig)}$$

Kommutator, Antikommutator [1, Glg. A.22, S. 51]

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \qquad \{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$

Produktregel [1, Glg. A.23]

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$$

Unbestimmtheitsrelation [1, Glg. A.160]

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\,\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geq \frac{|\,\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\,|^2}{4}$$

# Kapitel 3

# Zeitenwicklung & Hamiltonoperator

## 3.1 Zeitentwicklung

Definition [1, Glg. 3.2]

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$$

Eigenschaften [1, S. 56, Glg 3.3, 3.4]

$$\begin{aligned}
&\hat{U}(t_0,t_0) = 1 \text{ (Kontinuität)}\\
&\hat{U}(t,t_0)^\dagger = \hat{U}(t,t_0)^{-1} = \hat{U}(t_0,t) \text{ (Unitarität)}\\
&\hat{U}(t_2,t_0) = \hat{U}(t_2,t_1)\hat{U}(t_1,t_0) \text{ ("Propagatoreigeschaft")}
\end{aligned}$$

Taylorentwicklung [1, Glg. 3.4]

$$\hat{U}(t+dt,t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)dt + \cdots$$

Schrödingergleichung für den Zeitentwicklungsoperator und den Zustand [1, Glg. 3.5, 3.15]

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0) \qquad \Leftrightarrow \qquad i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\psi(t)\rangle$$

Formale Lösung für kommutierende Hamiltonians ($[\hat{H}(t_1),\hat{H}(t_2)] = 0$), Spektraldarstellung [1, Glg. 3.9]

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \hat{H}(\tau)d\tau} = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t E_n(\tau)d\tau}\,|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$$

Dysonscher Zeitordnungsoperator [1, Glg. A.196]

$$\mathcal{T}\left(\hat{H}(t_1),\hat{H}(t_2)\right) = \begin{cases}\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) & t_1 \geq t_2\\ \hat{H}(t_2)\hat{H}(t_1) & t_2 \geq t_1\end{cases}$$

Von Neumannsche Reihe für den Zeitentwicklungsoperator bei nicht notwendigerweise kommutierenden Hamiltonoperatoren [1, Glg. A.194]

$$\begin{aligned}
\hat{U}(t,t_0) &= \sum_{n=0}^\infty \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t\int_{t_0}^{t_1}\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}} \hat{H}(t_1)\cdots\hat{H}(t_n)dt_n\cdots dt_1\\
&= \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{n!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t\int_{t_0}^{t_1}\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}} \mathcal{T}\left(\hat{H}(t_1),\ldots,\hat{H}(t_n)\right)dt_n\cdots dt_1\\
&= \mathcal{T}e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t \hat{H}(\tau)d\tau}
\end{aligned}$$

## 3.2 Hamiltonoperator

Hamiltonian = Energieobservable, Spektraldarstellung für kommutierende Hamiltonians ($[\hat{H}(t_1), \hat{H}(t_2)] = 0$) [1, Glg. 3.6]

$$E = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle \qquad \hat{H}(t) = \sum_n E_n(t) |\varphi_n\rangle \langle\varphi_n|$$

Stationäre Schrödingergleichung [1, S. 3.36]

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$$

Korrespondenzprinzip, wichtige Hamiltonians [1, S. 59, Glg. 3.10-12]

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= H(x \to \hat{Q}, p \to \hat{P}) && \\
\hat{H}(t) &= \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\vec{Q}}, t) && \text{Teilchen im äußeren Potential} \\
\hat{H}(t) &= \frac{(\hat{P} - e\hat{\vec{A}})^2}{2m} + e\varphi(\hat{\vec{Q}}, t) && \text{Geladenes Teilchen im äußeren elektromag. Feld} \\
\hat{H}(t) &= -\mu\hat{\vec{B}}\hat{\vec{S}} && \text{Neutrales Spin-1/2-Teilchen im Magnetfeld}
\end{aligned}$$

Teilchen im äußeren Potential im Ortsraum [1, Glg. 3.31]

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi(\vec{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla} + V(\vec{x}, t)\right)\psi(\vec{x}, t)$$

Zeitabhängigkeit von Erwartungswerten [1, Glg. 3.42]

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H}(t), \hat{A}(t)]\rangle + \langle\frac{d\hat{A}(t)}{dt}\rangle$$

Hellman-Feynman-Theorem [1, Kap. A.12.3]

$$\frac{d}{d\lambda}E_n(\lambda) = \langle\varphi_n(\lambda)|\frac{d\hat{H}(\lambda)}{d\lambda}|\varphi_n(\lambda)\rangle$$

## 3.3 Heisenberg-Bild

Definition [1, Glg. 3.46]

$$|\psi^H(t)\rangle = |\psi^S(t_0)\rangle \qquad \hat{O}^H(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{O}^S\hat{U}(t, t_0)$$

Bewegungsgleichung [1, Glg. 3.51]

$$\frac{d}{dt}\hat{Q}^H(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0)\left(\frac{i}{\hbar}[\hat{H}^S(t), \hat{O}^S(t)] + \frac{d}{dt}\hat{O}^S(t)\right)\hat{U}(t, t_0)$$

Newtonische Bewegungsgleichung für den Ortsoperator [1, Glg. 3.55]

$$m\frac{d^2}{dt^2}\hat{\vec{X}}^H(t) = -\vec{\nabla}\hat{V}(\hat{\vec{X}}^H)$$

Ehrenfest-Theorem [1, Glg. 3.56]

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{\vec{X}}\rangle = \langle-\vec{\nabla}V(\hat{\vec{X}})\rangle$$

# Kapitel 4

# Spin 1/2

## 4.1 Basis

Kugelkoordinaten [1, Glg. 2.28]

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta \end{pmatrix}^T$$

$$|-\vec{n}\rangle = \sin\frac{\theta}{2}|+z\rangle - e^{i\varphi}\cos\frac{\theta}{2}|-z\rangle \qquad |+\vec{n}\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|+z\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|-z\rangle$$

Orthonormalität & Vollständigkeit [1, Glg. 2.21, 2.23]

$$\langle\pm\vec{n}|\pm\vec{n}\rangle = 1 \quad \langle\pm\vec{n}|\mp\vec{n}\rangle = 0 \qquad |-\vec{n}\rangle\langle-\vec{n}| + |+\vec{n}\rangle\langle+\vec{n}| = 1$$

Skalarprodukte [1, Folg. aus Tab. nach Glg. 2.28, ]

| | $\lvert-x\rangle$ | $\lvert-y\rangle$ | $\lvert-z\rangle$ | $\lvert+x\rangle$ | $\lvert+y\rangle$ | $\lvert+z\rangle$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $\langle-x\rvert$ | $1$ | $\frac{1+i}{2}$ | $\frac{-1}{\sqrt{2}}$ | $0$ | $\frac{i-i}{2}$ | $\frac{+1}{\sqrt{2}}$ |
| $\langle-y\rvert$ | $\frac{1-i}{2}$ | $1$ | $\frac{+i}{\sqrt{2}}$ | $\frac{1+i}{2}$ | $0$ | $\frac{+1}{\sqrt{2}}$ |
| $\langle-z\rvert$ | $\frac{-1}{\sqrt{2}}$ | $\frac{-i}{\sqrt{2}}$ | $1$ | $\frac{+1}{\sqrt{2}}$ | $\frac{+i}{\sqrt{2}}$ | $0$ |
| $\langle+x\rvert$ | $0$ | $\frac{1-i}{2}$ | $\frac{+1}{\sqrt{2}}$ | $1$ | $\frac{1+i}{2}$ | $\frac{+1}{\sqrt{2}}$ |
| $\langle+y\rvert$ | $\frac{1+i}{2}$ | $0$ | $\frac{-i}{\sqrt{2}}$ | $\frac{1-i}{2}$ | $1$ | $\frac{+1}{\sqrt{2}}$ |
| $\langle+z\rvert$ | $\frac{+1}{\sqrt{2}}$ | $\frac{+1}{\sqrt{2}}$ | $0$ | $\frac{+1}{\sqrt{2}}$ | $\frac{+1}{\sqrt{2}}$ | $1$ |

Darstellungen in allen Basen [1, Tab. nach Glg. 2.28 mit Folgerungen]

| $\vec{n}$ | $\theta$ | $\varphi$ | $\lvert\pm\vec{n}\rangle$ | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $x$ | $\frac{\pi}{2}$ | $0$ | $\lvert\pm x\rangle$ | $=$ | $\frac{1\mp i}{2}\lvert+y\rangle + \frac{1\pm i}{2}\lvert-y\rangle$ | $=$ | $\frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert+z\rangle \pm \lvert-z\rangle)$ |
| $y$ | $\frac{\pi}{2}$ | $\frac{\pi}{2}$ | $\frac{1\pm i}{2}\lvert+x\rangle + \frac{1\mp i}{2}\lvert-x\rangle$ | $=$ | $\lvert\pm y\rangle$ | $=$ | $\frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert+z\rangle \pm i\lvert-z\rangle)$ |
| $z$ | $0$ | $\pi$ | $\frac{1}{\sqrt{2}}(\lvert+x\rangle \pm \lvert-x\rangle)$ | $=$ | $\frac{1}{1\lvert i\sqrt{2}}(\lvert+y\rangle \pm \lvert-y\rangle)$ | $=$ | $\lvert\pm z\rangle$ |

## 4.2 Operatoren

Spektraldarstellung [1, Glg. 2.30]

$$\hat{S}_{\vec{n}} = \frac{\hbar}{2}\left(|+\vec{n}\rangle\langle+\vec{n}| - |-\vec{n}\rangle\langle-\vec{n}|\right)$$

Eigenschaften [1, Glg. 2.35, 2.34]

$$\hat{S}_{\vec{n}}^2 = \frac{\hbar^2}{4} \text{ (involut proportional)} \qquad \left[\hat{S}_i, \hat{S}_j\right] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{S}_\gamma$$

Matrixdarstellung in $z$-Basis [1, Glg. 2.31]

$$\hat{S}_x^{(z)} = \frac{\hbar}{2}\sigma_x \qquad \hat{S}_y^{(z)} = \frac{\hbar}{2}\sigma_y \qquad \hat{S}_z^{(z)} = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$$

## 4.3 Pauli-Matrizen

- Indizes: $i, j, k \in \{1, 2, 3\}$, $\alpha, \beta, \gamma \in \{0, 1, 2, 3\}$ [1]

Definition [1, Glg. 2.31, S.52]

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Basis aller 2x2-Matrizen [1, Übung]

$$\begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} \\ a_{10} & a_{11} \end{pmatrix} = \frac{a_{00} + a_{11}}{2}\sigma_0 + \frac{a_{01} + a_{10}}{2}\sigma_x + i\frac{a_{01} - a_{10}}{2}\sigma_y + \frac{a_{00} - a_{11}}{2}\sigma_z$$

Eigenschaften [1, Glg. 2.32]

$$\sigma_\alpha^\dagger = \sigma_\alpha \text{ (hermitesch)} \qquad \det \sigma_i = -1 \qquad \sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$$

$$\sigma_\alpha^\dagger = \sigma_\alpha^{-1} \text{ (unitär)} \qquad \operatorname{tr} \sigma_i = 0 \qquad [\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$$

$$\sigma_\alpha^2 = 1 \text{ (involut)} \qquad \sigma_p(\sigma_i) = \{-1, +1\} \qquad \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$$

[1]Torsten Fließbach. *Mechanik. Lehrbuch zur Theoretischen Physik I.* 8. Aufl. Springer Berlin Heidelberg, 2020. ISBN: 978-3-662-61603-1. DOI: 10.1007/978-3-662-61603-1.

# Kapitel 5

# Orts- & Impulsraum

- Im diskreten Fall sind die Integrale durch Summen und die Delta-Distributionen durch Kronecker-Deltas zu ersetzen.
- Für $n$ ist die Dimensionalität zu verwenden.

Spektraldarstellung [1, Glg. A.96, A.99, A.127, A.128]

$$\hat{\vec{Q}} = \int_{\mathbb{R}^n} \vec{x} \left|\vec{x}\right\rangle \left\langle\vec{x}\right| d\vec{x} \qquad \hat{\vec{Q}} \left|\vec{x}\right\rangle = \vec{x} \left|\vec{x}\right\rangle$$

$$\hat{\vec{P}} = \int_{\mathbb{R}^n} \vec{p} \left|\vec{p}\right\rangle \left\langle\vec{p}\right| d\vec{p} \qquad \hat{\vec{P}} \left|\vec{p}\right\rangle = \vec{p} \left|\vec{p}\right\rangle$$

Basis (Orthonormalität & Vollständigkeit) [1, Glg. A.85, A.86, A.122, A.124, A.106, A.108]

$$\langle\vec{x}|\vec{y}\rangle = \delta(\vec{x}-\vec{y}) \qquad \int_{\mathbb{R}^n} \left|\vec{x}\right\rangle \left\langle\vec{x}\right| d\vec{x} = 1$$

$$\langle\vec{p}|\vec{q}\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{q}) \qquad \int_{\mathbb{R}^n} \left|\vec{p}\right\rangle \left\langle\vec{p}\right| d\vec{p} = 1$$

$$\langle\vec{k}|\vec{l}\rangle = \delta(\vec{k}-\vec{l}) \qquad \int_{\mathbb{R}^n} \left|\vec{k}\right\rangle \left\langle\vec{k}\right| d\vec{k} = 1$$

Wirkung untereinander [1, Glg. A.129, S. A.56]

$$\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^n} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{x}\vec{p}} \qquad \langle\vec{x}|\vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} e^{i\vec{x}\vec{k}}$$

Kommutator [1, Glg. A.151, A.152, A.153]

$$\left[\hat{Q}_j, \hat{P}_k\right] = i\hbar\delta_{ij} \qquad \left[\hat{Q}_j, f(\hat{\vec{Q}}, \hat{\vec{P}})\right] = i\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{P}_j} f(\hat{\vec{Q}}, \hat{\vec{P}}) \qquad \left[f(\hat{\vec{Q}}, \hat{\vec{P}}), \hat{P}_j\right] = i\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{Q}_j} f(\hat{\vec{Q}}, \hat{\vec{P}})$$

Wirkung auf Wellenfunktion [1, Glg. A.83, A.125, A.113]

$$\langle\vec{x}|f\rangle = f(\vec{x}) \qquad \langle\vec{p}|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar}^n}\mathcal{F}[f](\vec{p}) \qquad \langle\vec{k}|f\rangle = \mathcal{F}[f](\vec{k})$$

Darstellung in anderen Räumen [1, Glg. A.132, eigene Folgerung, S. A.60]

$$\hat{\vec{P}} = -i\hbar\int_{\mathbb{R}^n} \left|\vec{x}\right\rangle \vec{\nabla} \left\langle\vec{x}\right| d\vec{x} \qquad \hat{\vec{Q}} = +i\hbar\int_{\mathbb{R}^n} \left|\vec{p}\right\rangle \vec{\nabla} \left\langle\vec{p}\right| d\vec{p} \qquad \left|\vec{p}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar}^n}\left|\vec{k}\right\rangle$$

# Kapitel 6

# Harmonischer Oszillator

Hamiltonian [1, Glg. 4.61, 4.65]

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{\omega^2 m}{2}\hat{Q}^2 = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$$

Leiteroperatoren (Erzeugungs- & Vernichtungsoperator) [1, Glg. 4.62]

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{Q} - i\frac{\hat{P}}{m\omega}\right) \qquad \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{Q} + i\frac{\hat{P}}{m\omega}\right)$$

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right) \qquad \hat{P} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right)$$

Anzahloperator [1, Glg. 4.64, 4.75]

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a} = \sum_{n\in\mathbb{N}_0} n\left|n\right\rangle\left\langle n\right|$$

Wirkung [1, Glg. 4.72, 4.73, 4.75, 4.77]

$$\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle \qquad \hat{a}\left|n\right\rangle = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle \qquad \hat{N}\left|n\right\rangle = n\left|n\right\rangle \qquad \left|n\right\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\left|0\right\rangle$$

Eigenschaften [1, Glg. 4.66, 4.67]

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \qquad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \qquad [\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}$$

Erwartungswerte & charakteristische Skala [1, Glg. 4.82, nach Glg. 4.79]

$$\langle n|\hat{Q}|n\rangle = 0 \qquad \langle n|(\Delta\hat{Q})^2|n\rangle = \frac{x_0^2}{2}(2n+1) \qquad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$\langle n|\hat{P}|n\rangle = 0 \qquad \langle n|(\Delta\hat{P})^2|n\rangle = \frac{p_0^2}{2}(2n+1) \qquad p_0 = \sqrt{\hbar m\omega}$$

Lösung im Ortsraum [1, Glg. 4.86]

- Hermite-Funktionen im Kapitel Wellenfunktionen

Mehrdimensionaler Harmonischer Oszillator [2, Kap. 4.4.6]

$$\hat{H} = \sum_j \hat{H}_j \qquad E_{\vec{n}} = \sum_j E_{n_j} \qquad \left|\vec{n}\right\rangle = \prod_j \left|n_j\right\rangle \qquad \text{(separierbar)}$$

## 6.1 Kohärente Zustände

Definition [1, Glg. 4.95, 4.97]

$$\hat{a}\left|\lambda\right\rangle = \lambda\left|\lambda\right\rangle \qquad \Leftrightarrow \qquad \left\langle\lambda\right|\hat{a}^\dagger = \left\langle\lambda\right|\lambda^*$$

Darstellung [1, Glg. 4.96]

$$\left|\lambda\right\rangle = e^{\frac{-|\lambda|^2}{2}}\sum_{n\in\mathbb{N}_0}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\left|n\right\rangle$$

# Kapitel 7

# Symmetrien

## 7.1 Nöthersches Theorem

Aussage & Beispiele [1, S. 192]

$$\begin{aligned}
\text{System invariant unter } e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{A}} &\quad\Leftrightarrow\quad \left[\hat{H}, \hat{A}\right] = 0 \\
\text{Zeitinvarianz} &\quad\Leftrightarrow\quad \text{Energieerhaltung} \\
\text{Translationsinvarianz} &\quad\Leftrightarrow\quad \text{Impulserhaltung} \\
\text{Rotationsinvarianz} &\quad\Leftrightarrow\quad \text{Drehimpulserhaltung}
\end{aligned}$$

## 7.2 Translationen

Definition & Wirkung, Erzeuger [1, Glg. 6.12, 6.8, 6.11]

$$\langle\vec{x}|\,\hat{T}_{\vec{a}} = \langle\vec{x}-\vec{a}| \qquad \hat{T}_{\vec{a}}\,|\vec{x}\rangle = |\vec{x}+\vec{a}\rangle \qquad \hat{T}_{\vec{a}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{P}}\vec{a}}$$

Eigenwerte und -vektoren im Ortsraum [1, Glg. 6.15]

$$\hat{T}_{\vec{a}}\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{a}}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{a}}\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{a}}}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}$$

Nöther (Translationsinvarianz ⇔ Impulserhaltung) [1, Glg. 6.16]

$$[\hat{H}, \hat{T}_{\vec{a}}] = 0 \qquad\Leftrightarrow\qquad [\hat{H}, \hat{\vec{P}}] = 0$$

## 7.3 Parität

Definition [1, Glg. 4.32]

$$\hat{S}\,|\vec{x}\rangle = |-\vec{x}\rangle \qquad\Leftrightarrow\qquad \langle\vec{x}|\,\hat{S} = \langle-\vec{x}|$$

Eigengleichung [1, Glg. 4.33]

$$\hat{S}\,|\psi_s\rangle = s\,|\psi_s\rangle \qquad s = \begin{cases} +1 & \text{(gerade)} \\ -1 & \text{(ungerade)} \end{cases}$$

## 7.4 Drehungen

- Alles auch für $\hat{\vec{L}}$ bzw. $\hat{\vec{S}}$ bei spinlosen bzw. punktförmigen Teilchen. [1, S. 202f]

Erzeuger [1, Glg. 6.22]

$$\hat{R}_{\vec{n}}(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\vec{n}\hat{\vec{J}}}$$

Für Spins [1, Glg. 6.23]

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi\vec{n}\hat{\vec{S}}} = \cos\frac{\varphi}{2} - i\vec{n}\vec{\sigma}\sin\frac{\varphi}{2}$$

Bahndrehimpuls- & (Gesamt-)Drehimpulsoperator (Definition) [1, Glg. 6.29, 6.30]

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{Q}} \times \hat{\vec{P}} \qquad \hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$$

Leiteroperatoren (Definition) [1, Glg. 6.35]

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \qquad \hat{J}_x = \frac{\hat{J}_+ + \hat{J}_-}{2} \qquad \hat{J}_y = \frac{\hat{J}_+ - \hat{J}_-}{2i}$$

Wirkung [1, Glg. 6.52, 6.57, 6.41]

$$\begin{aligned} &\hat{\vec{J}}^2 \left|j,m\right\rangle = \hbar^2 j(j+1)\left|j,m\right\rangle && \hat{J}_z\left|j,m\right\rangle = \hbar m\left|j,m\right\rangle \\ &\hat{J}_\pm\left|j,m\right\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\left|j,m\pm1\right\rangle && \hat{S}_\pm\left|\mp z\right\rangle = \left|\pm z\right\rangle \quad \hat{S}_\pm\left|\pm z\right\rangle = 0 \end{aligned}$$

Eigenschaften [1, Glg. 6.31, 6.32, 6.36]

$$\left[\hat{J}_j, \hat{J}_k\right] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{J}_l \qquad \hat{\vec{J}} \times \hat{\vec{J}} = i\hbar\hat{\vec{J}}$$

$$\left[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{J}_\pm \qquad \left[\hat{J}_+, \hat{J}_-\right] = 2\hbar\hat{J}_z \qquad \left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_\pm\right] = 0$$

Drehimpulsquantenzahl & magnetische Quantenzahl des Drehimpulsop. [1, Tab. 6.1]

$$\left|j,m\right\rangle \qquad j \in \left\{\frac{n}{2} \mid n \in \mathbb{N}_0\right\} \qquad m \in \{-j,\dots,+j\}$$

"Skalare" Operatoren und "Vektor"-Operatoren [1, Glg. 6.33, 6.34]

$$[\hat{\vec{J}}, \hat{A}] = 0 \qquad [\hat{J}_i, \hat{A}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{A}_k$$

# Kapitel 8

# Wellenfunktion

Randbedingungen [1, Kap. 4.1.2]

- $\psi(x)$ immer stetig
- unendliches Potential $\Rightarrow \psi(\vec{x}) = 0$
- endliches Potential $\Rightarrow \psi'(x)$ stetig
- unendliche Potentialkante $\Rightarrow \psi'(x)$ unstetig

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte [1, Glg. A.97]

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2$$

Parität [1, S. 105]

- Bei einem symmetrischen Potential können die Eigenfunktionen von $\hat{H}$ gerade & ungerade gewählt werden.

Reelle Wellenfunktionen [1, S. 111]

$$\psi(\vec{x}, t) \in \mathbb{R} \qquad \Rightarrow \qquad \rho(\vec{x}, t) = \rho(\vec{x}) \qquad \Rightarrow \qquad \vec{j}(\vec{x}, t) = \vec{0}$$

## 8.1 Eindimensionale Potentialprobleme

Entartung [1, Kap. 4.6.3]

- Gebundene Zustände im Eindimensionalen sind nie entartet.

Knotensatz [1, Kap. 4.6.4]

- Die Wellenfunktion von $E_n$ hat $n$ Nullstellen im Eindimensionalen. ($\cdots < E_n < E_{n+1} < \cdots,\ n \in \mathbb{N}_0$)

Realität [1, Kap. 4.6.5]

- Die Wellenfunktionen der gebundenen Eigenzustände eines eindimensionalen Potentialproblems ohne Magnetfeld können immer reell gewählt werden.

### 8.1.1 Spezielle Potentiale

Konstantes Potential $V(x) = V$ [1, Glg. 4.5]

$$\psi(x) = ae^{+ikx} + be^{-ikx} = ae^{+\kappa x} + be^{-\kappa x}$$
$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)} \qquad \kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V - E)} = ik$$

Unendlicher Potentialtopf $V(x) = \begin{cases} V_0 & x \in [0, L] \\ \infty & x \notin [0, L] \end{cases}$ [1, Glg. 4.7-4.9]

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_n x & x \in [0, L] \\ 0 & x \notin [0, L] \end{cases} \qquad k_n = \frac{n\pi}{L} \qquad E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 + V_0 \qquad n \in \mathbb{N}^+$$

Potentialbarriere $V(x) = \begin{cases} V_0 & x \in [-L/2, +L/2] \\ 0 & x \notin [-L/2, +L/2] \end{cases}$ [1, Glg. 4.53, 4.48, 4.49, 4.54]

$$\psi(\vec{x}, t) = \begin{cases} e^{+ikx} + Ae^{-ikx} & x \leq -L/2 \\ B_1 e^{+\kappa x} + Be^{-\kappa x} & -L/2 \leq x \leq +L/2 \\ Ce^{+ikx} & +L/2 \leq x \end{cases}$$

$$\begin{aligned} k &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} & \kappa &= \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \\ A &= \frac{1}{Z}e^{-ikL}(1 + \rho^2)\sinh \kappa L & B_1 &= -\frac{1}{Z}e^{-ikL/2}(1 - i\rho)e^{-\kappa L/2} \\ C &= \frac{1}{Z}i2\rho e^{-ikL} & B_2 &= +\frac{1}{Z}e^{-ikL/2}(1 + i\rho)e^{+\kappa L/2} \\ \rho &= \frac{\kappa}{k} & Z &= (1 - \rho^2)\sinh \kappa L + 2i\rho \cosh \kappa L \\ T &= |C|^2 & R &= |A|^2 \end{aligned}$$

## 8.2 Basen

Hermite-Funktionen & Hermite-Polynome [1]

$$h_n(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x) \qquad H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-t^2}$$

Kugelflächenfunktionen & zugeordnete Legendre-Polynome [1, Glg. 6.59]

$$\langle \theta, \varphi | l, m \rangle = Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l + 1)(l - m)!}{4\pi(l + m)!}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos\theta)$$
$$P_l^m(\cos\theta) = \frac{\sin^m \theta}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{d(\cos\theta)^{l+m}} \sin^{2l} \theta$$

[1] Jussi Behrndt, Markus Holzmann und Peter Schlosser. *Funktionalanalysis und partielle Differentialgleichungen. Skriptum.* Wintersemester 2020/21, Bsp. 2.16ii.

# Kapitel 9

# Störungstheorie

## 9.1 Zeitunabhängige Störungstheorie

### 9.1.1 Nicht entartet

Grundzustandsenergie durch Variationsansatz [1, Glg. 5.3]

$$E_0 = \min \langle \psi(\lambda)|\hat{H}|\psi(\lambda)\rangle$$

Schrödingersche Störungsrechnung [1, Glg. 5.15, 5.16]

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots \qquad |\varphi_n\rangle = |\varphi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\varphi_n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |\varphi_n^{(2)}\rangle + \cdots$$

Korrekturen [1, Glg. 5.19, 5.22, 5.25, 5.23]

$$E_n^{(1)} = \langle \varphi_n^{(0)}|\hat{H}_1|\varphi_n^{(0)}\rangle \qquad |\varphi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n} |\varphi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle \varphi_m^{(0)}|\hat{H}_1|\varphi_n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{\left|\langle \varphi_m^{(0)}|\hat{H}_1|\varphi_n^{(0)}\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} < 0 \qquad \langle \varphi_n^{(0)}|\varphi_n^{(1)}\rangle = 0$$

### 9.1.2 Entartet

Aufspaltung [1, S. 169]

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 \qquad \text{Entartung bei } n \in \mathcal{N}.$$

$$\hat{P} = \sum_{n\in\mathcal{N}} |\varphi_n\rangle \langle\varphi_n| \qquad \hat{Q} = \sum_{n\notin\mathcal{N}} |\varphi_n\rangle \langle\varphi_n| = 1 - \hat{P}$$

$$\hat{\tilde{H}}_0 = \hat{H}_0 + \lambda \hat{P}\hat{H}_1\hat{P} \qquad \lambda\hat{\tilde{H}}_1 = \lambda\hat{P}\hat{H}_1\hat{Q} + \lambda\hat{Q}\hat{H}_1\hat{P} + \lambda\hat{Q}\hat{H}_1\hat{Q}$$

Korrekturen der entarteten Zustände [1, Glg. 5.37, 5.38, 5.39]

$$\tilde{E}_n^{(1)} = 0 \qquad |\tilde{\varphi}_n^{(1)}\rangle = \sum_{m\notin\mathcal{N}} |\tilde{\varphi}_m^{(0)}\rangle \frac{\langle \tilde{\varphi}_m^{(0)}|\hat{H}_1|\tilde{\varphi}_n^{(0)}\rangle}{\tilde{E}_n^{(0)} - \tilde{E}_m^{(0)}}$$

$$\tilde{E}_n^{(2)} = \sum_{m\notin\mathcal{N}} \frac{\left|\langle \tilde{\varphi}_m^{(0)}|\hat{H}_1|\tilde{\varphi}_n^{(0)}\rangle\right|^2}{\tilde{E}_n^{(0)} - \tilde{E}_m^{(0)}}$$

## 9.2 Zeitabhängige Störungstheorie

Aufspaltung [1, Glg. 5.40]

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t)$$

Wechselwirkungsbild [1, Glg. 5.46, 5.49, 5.48]

$$\begin{aligned}
|\psi^I(t)\rangle &= \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\,|\psi(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)\,|\psi(t)\rangle \\
\hat{H}_1^I(t) &= \hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\hat{H}_1(t)\hat{U}_0(t,t_0) \\
i\hbar\frac{d}{dt}\,|\psi^I(t)\rangle &= \hat{H}_1^I(t)\,|\psi^I(t)\rangle
\end{aligned}$$

Störungsentwicklung von Wellenfunktionen [1, Glg. 5.52, 5.53, 5.54, 5.57, 5.58, 5.59, 5.62, 5.62]

$$\begin{aligned}
|\psi^I(t)\rangle &= \sum_{l=0}^{\infty} |\psi^{I,l}(t)\rangle & i\hbar\frac{d}{dt}\,|\psi^{I,(l+1)}(t)\rangle &= \hat{H}_1^I(t)\,|\psi^{I,l}(t)\rangle \\
|\psi^{I,0}(t)\rangle &= |\psi(t_0)\rangle & |\psi^{I,(l+1)}(t)\rangle &= -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \hat{H}_1^I(\tau)\,|\psi^{I,l}(\tau)\rangle\,d\tau \\
|\psi^I(t)\rangle &= \sum_n c_n(t)\,|\varphi_n\rangle & |\psi^{I,l}(t)\rangle &= \sum_n c_n^{(l)}(t)\,|\psi_n\rangle \\
c_n(t) &= \sum_{l=0}^{\infty} c_n^{(l)}(t) & c_m^{(l+1)} &= -\frac{i}{\hbar}\sum_n \int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{mn}\tau} H_{1,mn}(\tau) c_n^{(l)}(\tau)d\tau \\
H_{1,mn}(\tau) &= \langle\varphi_m|\hat{H}_1^S\tau|\varphi_n\rangle & \omega_{mn} &= \frac{\epsilon_m - \epsilon_n}{\hbar}
\end{aligned}$$

Übergangsrate bei konstanter Störung [1, Glg. 5.78]

$$W_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar^2}|H_{fi}|^2\Delta_t\left(\frac{\epsilon_i - \epsilon_f}{\hbar}\right) \qquad \Delta_t(\omega) = \frac{t}{2\pi}\left(\frac{\sin\frac{\omega t}{2}}{\frac{\omega t}{2}}\right)^2$$

Fermis Goldene Regel für die Übergangsrate [1, Glg. 5.81]

$$W_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}|H_{1,fi}|^2\delta(\epsilon_i - \epsilon_f)$$

Übergangsrate bei harmonischer Störung [1, Glg. 5.88]

$$W_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(|H_{1,fi}|^2\delta(\epsilon_f - \epsilon_i + \hbar\Omega) + |H_{1,fi}^*|^2\delta(\epsilon_f - \epsilon_i - \hbar\Omega)\right)$$